

ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМАЦИИ СПЛАВА Ni_3Al С УЧЕТОМ ТЕЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

Хорошилов Д.Е., Яшин А.В., Сеница Н.В.

Старостенков М.Д. – д.ф.м.н., профессор

ПАТП, г. Рубцовск

e-mail: dimdionis@mail.ru

Введение

Наличие междоузлий в кристалле определяют многие свойства сплава. В данной работе проводится исследование влияния точечных дефектов внедрения на прочность кристалла, проводится анализ стадий одноосной деформации растяжения. Для того, чтобы отследить атомную перестройку на более детальном уровне, исследование процесса деформации проводилось методом молекулярной динамики. Скорость растяжения кристалла составила 20 м/с. Рассматривается особенность течения основных стадий деформации: этапов квазиупругой и пластической деформации, - при различных температурах системы и концентраций точечных дефектов в ней.

Модель и методика моделирования

В качестве модельного сплава выбран сплав Ni_3Al с кубической гранецентрированной решеткой со сверхструктурой L1_2 . Размер расчетного блока составляет 10638 атомов. На границы расчетного блока кристалла накладываются свободные граничные условия в направлениях $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ и жесткие в направлении $\langle 001 \rangle$. Для моделирования процесса атомной перестройки применяется метод молекулярной динамики. Взаимодействие атомов в кристалле задается с помощью парных потенциальных функции Морзе (1).

(1)

где α_{KL} , β_{KL} , D_{KL} – параметры, определяющие взаимодействие пары атомов сорта K и L ; r – расстояние между атомами. Взаимодействие атомов предполагается зависящим лишь от межатомного расстояния. При расчетах взаимодействия атомов был взят радиус обрезания равный трем координационным сферам.

Потенциальная энергия системы N атомов представляется в виде:

(2)

где r_i , – радиус-векторы i -го атома.

При рассмотрении замкнутой системы, сила, действующая на i -й атом, будет равна:

(3)

Система уравнений движения в классическом виде представляется как:

∴ (4)

где m_i и v_i – масса и скорость i -го атома, t – время.

Для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений применяется численный метод Эйлера с полушагом.

Абсолютное значение начальных скоростей атомов в идеальном кристалле рассчитываются по формуле:

(5)

где k_b – постоянная Больцмана, T – температура.

Результаты и обсуждения

Были рассмотрен процесс деформации при следующих условиях:

- 1) 8 межузлий (6 сорта А; 2 сорта В) при температуре 600 К.
- 2) 12 межузлия (8 сорта А; 4 сорта В) при температуре 100 К.
- 3) 8 межузлия (6 сорта А; 2 сорта В) при температуре 85 К.

Все эксперименты длились в течение 500 Пс и охлаждении в течение 100 Пс.

а) 8 межузельных атомов при 600 К

б) 12 межузельных атомов при 100 К в) 8 межузельных атомов при 85 К

Рисунок 1. Изменение потенциальной энергии в процессе деформации

Во всех экспериментах можно выделить четыре четко выраженных этапа: этап квазиупругой деформации (I), этап пластической деформации (II), этап образования шейки разрыва кристалла (III) и этап разрушения (IV)

На этапе квазиупругой деформации происходит относительное смещение атомов, без образования видимых и четких дефектов. Рост процента концентрации межузельных атомов в кристалле приводит к незначительному снижению длительности этого этапа. Температура в данной ситуации является более существенным фактором. Более высокие температуры значительно раньше приводят и без того подвижные межузельные атомы в активное состояние, что является следствием в какой-то мере слияния этапов квазиупругой и пластической деформации. Эти этапы как бы чередуются в процессе растяжения кристалла. По мере накопления напряженности происходит образование границ разрыва. С ростом напряженности кристалла, происходит образование новых подчастей кристалла или развитие самих границ разлома. В уже в частично обособившихся подчастях кристалла некоторое время идет процесс квазиупругой деформации (об этом говорит параболическое изменение потенциальной энергии кристалла на графике). С

течением времени продолжительность таких этапов квазиупругой деформации уменьшается. При низких температурах активность межузельных атомов не столь высока. В этом случае можно заметить некое снижение продолжительности этапа квазиупругой деформации и увеличение этапа пластической.

На этапе пластической деформации происходит образование антифазных границ. Для этой стадии характерно наличие нескольких точек бифуркаций запасенной энергии упругой деформации, что говорит о появлении новых типов и коллективов структурных и сверхструктурных дефектов. При более высоких температурах сложно выделить чистый этап пластической деформации, при низких же он протекает классически (с ярко выраженными точками бифуркации запасенной энергии).

Литература

1. Горлов Н. В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A_3B и $A_3B(C)$, диссертация к.ф.-м.н., Томск 1987.
2. Полетаев Г. М. Атомные механизмы диффузии в металлических системах с ГЦК решеткой, диссертация д.ф.-м.н., Барнаул 2006
3. Starostenkov M. D., Ovcharov A. A. Crystal Argon Stability under Stretching Stress/ Computational Materials Science, 14 (1999), pp. 215-219.